

2227

Reprinted from *Acta Crystallographica*, Vol. 18, Part 2, February 1965

PRINTED IN DENMARK

Acta Cryst. (1965). 18, 252

The Crystal Structure of *o*-Nitroperoxybenzoic Acid

By M. SAX, P. BEURSKENS AND S. CHU

The Crystallography Laboratory, The University of Pittsburgh, Pittsburgh 13, Pa., U.S.A.

(Received 21 February 1964)

The crystal structure of *o*-nitroperoxybenzoic acid, $C_7H_5NO_5$, has been determined by a three-dimensional structure analysis. The peroxycarboxyl group is shown to have the skewed conformation and the dihedral angle is 146° . Evidence is given suggesting that the intermolecular hydrogen bond largely determines the value of the dihedral angle in the hydrogen bonded peroxides in the solid state. The influence upon the angle exerted by exchange repulsion forces between the lone pair electrons of the peroxide oxygen atoms appears to be small in comparison. The bond lengths are C=O 1.21₄, C-O 1.33, O-O 1.47₈ Å, and O-H 1.1₂ Å. The valency angles are O=C-O 124.7, C-O-O 108.9, and O-O-H 112°. A 5° torsional angle about the C-O bond displaces the carboxyl oxygen atom 0.09 Å (20σ) from the C-O-O plane, so that the carboxyl oxygen atom and the hydrogen atom are on opposite sides of the plane.

Five of the atoms in the benzene ring are coplanar, and the C atom attached to the NO₂ group is displaced 0.025 Å (5σ) from this plane. The N atom is displaced 0.154 Å (30σ) in the same direction. The C atom of the OCOOH group is displaced 0.074 Å (15σ) on the opposite side of the plane. The plane of the ring atoms makes a 58° angle with the OCO plane and a 28° angle with the ONO plane. There are indications of steric strain between the substituent groups. Glide related molecules are hydrogen bonded into an infinite chain.

Introduction

Swern & Silbert (1963) have given a resume of the formation that has been acquired within the past

decade on the structure of several important classes of organic peroxides. They point out that single-crystal studies are needed to establish the structures of the peroxy acids, diacyl peroxides, and tertiary-butyl

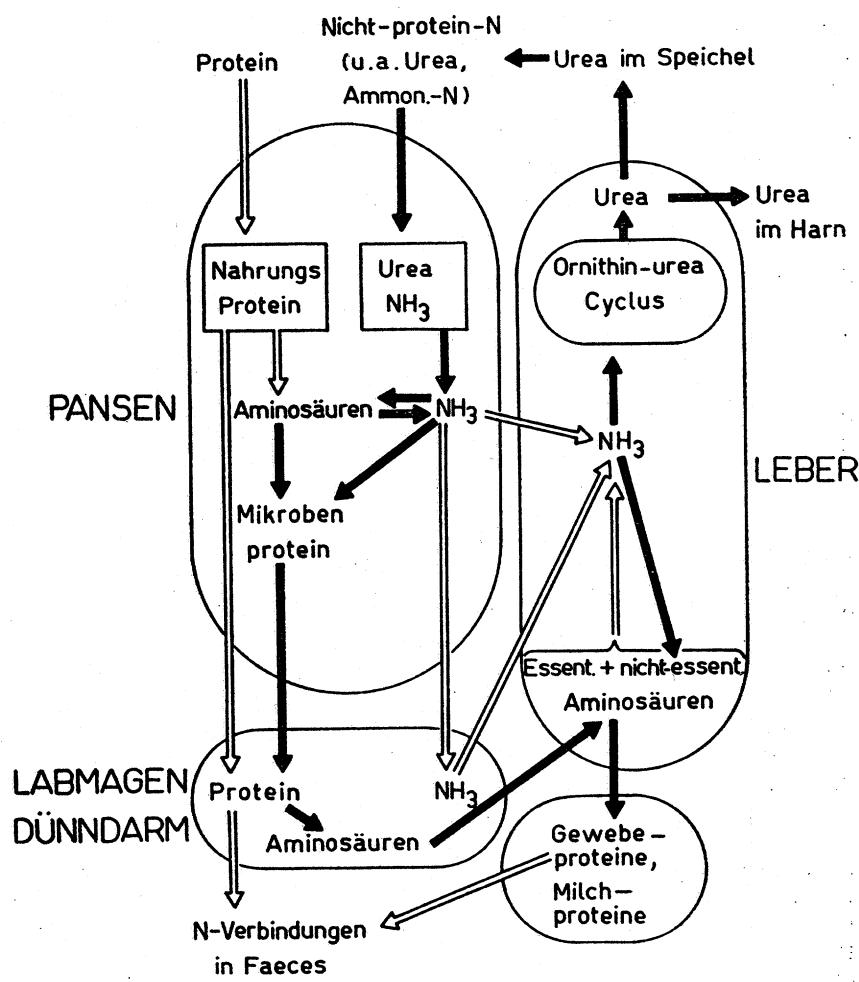


Abb. 11
Schema der Verwertung von Protein- und Nicht-Proteinstickstoff bei der Kuh.

Versuchskühe bildet, ist nicht die günstigste für die Funktion des Pansens. Deswegen erhöht der Zusatz von Stroh zu unserer proteinfreien Diät die Milchproduktion, sogar 1 kg Stroh pro Tag hat eine günstige Wirkung auf die Funktion des Pansens gehabt. Da unsere Absicht war, Milch unter Anwendung von gereinigten Nährstoffen zu erzeugen, verwendeten wir Stroh nur im Anfang unseres Versuches. Im Falle, daß eine proteinfreie Fütterung in die Praxis umgesetzt würde, wäre es leicht, genügend schwerverdauliches Pflanzenmaterial bereitzustellen. Die schwere Aufgabe liegt darin, billiges, gut verdauliches, für die Fütterung der Kühe geeignetes Kohlenhydratmaterial zu erhalten. Wenn dies gelingt, können sich neue Möglichkeiten

für eine Milchproduktion in weiten Gebieten der Erde eröffnen, wo Mangel an essentiellen Aminosäuren und Vitaminen herrscht. Im Augenblick kann nichts über diese Möglichkeiten gesagt werden.

Jedenfalls haben unsere Versuche gezeigt, daß die Kuh, die eines der ältesten Haustiere des Menschen ist, imstande ist, sich sogar den allerneuesten Bestrebungen des Menschen, hochwertige Proteine nur unter Anwendung von einfachen Stickstoffverbindungen zu erzeugen, anzupassen.

Literatur

1. NURMIKKO, V., *Ann. Acad. Sci. Fenniae, Ser. A II.*, No. 54 (1954).
2. LAND, H. und VIRTANEN, A. I., *Acta Chem. Scand.* 13, 489 (1959).
3. VIRTANEN, A. I. und LAMPILA, M., *Suomen Kemistilehti B*, 35, 244 (1962).
4. VIRTANEN, A. I., *Suomen Kemistilehti B*, 36, 83 (1963).
5. VIRTANEN, A. I., *Biochem. Z.*, 338, 443 (1963).
6. VIRTANEN, A. I., *Umschau*, 63, 770 (1963).
7. VIRTANEN, A. I., *Deutsches Mediz. J.*, 14, 788 (1963).
8. VIRTANEN, A. I. und SYVÄOJA, E.-L., *Suomen Kemistilehti B*, 37, 134 (1964).
9. ZUNTZ, N., *Pflüger's Arch. ges. Physiol.*, 49, 483 (1891).
10. LOOSLI, J. K., WILLIAMS, H. H., THOMAS, W. E., FERRIS, F. H. und MAYNARD, L. A., *Science*, 110, 144 (1949).
11. ELLIS, W. C., FLYNN, L. M., HARGUS, W. A. und PFANDER, W. H., *Federation Proc.*, 18, 1 (1959).

Tabelle 3
Vitaminengehalt der Milch der Versuchskühe und der Milch aus zwei Landgütern, µg/100 ml

Herkunft der Milch	Thiamin	Riboflavin	Nicotinsäure	Pyridoxin	Folsäure	Biotin	Pantothen-säure	Ascorbin-säure	Cholin
Pella	55 (42—70)	364 (321—403)	160 (131—221)	42 (36—52)	2,5	4,2	564	2867 (2400—3500)	17,8 (17,0—18,5)
Eiru	54 (37—54)	394 (293—520)	224 (193—258)	51 (40—64)	2,3 (1,6—2,7)	5,1 (2,6—8,0)	946 (825—1067)	2683 (2500—2900)	20,7 (18,4—23,0)
Ela	47 (34—58)	340 (222—450)	235 (207—270)	136 (96—176)	3,3 (3,2—3,4)	3,8 (2,5—5,0)	723 (520—910)	2233 (2100—2500)	14,0
Aino	43 (31—51)	339 (267—423)	253 (188—281)	87 (65—109)	3,4 (2,9—3,9)	2,4 (1,9—3,3)	671 (276—1070)	2075 (2000—2200)	15,4
Landgut 1	48 (32—58)	234 (209—267)	158 (118—195)	68 (49—80)	3,3 (3,0—3,9)	4,2 (3,1—5,6)	322 (230—430)	2260 (2000—2400)	18,5 (17,3—19,6)
Landgut 2	57	199	119	65	2,1		2100		20,3